# Polycopie du TP simulation des procédés industriels

# I. Introduction (Conception et simulation d'une unité de production)

La conception d'une unité de production chimique est une opération complexe qui demande des moyens financiers et humains très importants. Dans le contexte actuel, un procédé industriel doit répondre à trois critères : l'économie, la sécurité et l'environnement.

Ainsi, lorsqu'un nouveau procédé est développé, le rôle de l'ingénieur consiste à trouver le système le plus adapté non seulement en termes d'efficacité et de sécurité, mais aussi de coût et de rentabilité pour fabriquer le produit. A ce titre, la simulation peut être d'une aide très précieuse en prenant en charge et en traitant ces problèmes. Surtout lorsque de nombreuses variables sont en jeu (diversité des composantes, complexité des interactions, non linéarité des phénomènes,…etc.).

# II. Modèle et simulation

Lorsque le système réel que l'on souhaite observer devient trop complexe et que de nombreuses variables sont en jeu, la modélisation intervient pour prendre en charge et traiter les problèmes : un modèle est élaboré pour essayer de rendre compte de la complexité du système tout en essayant de réduire le nombre de paramètres.

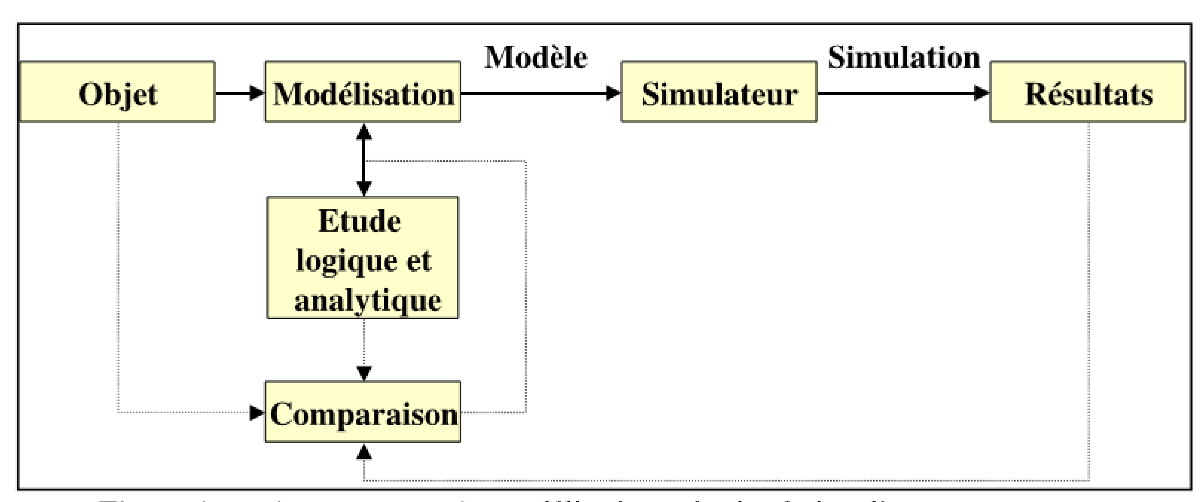



**Figure 1**. Logigramme pour la modélisation et la simulation d'un processus.

L'analyse du système, la modélisation et la simulation constituent les trois étapes fondamentales de l'étude du comportement dynamique des systèmes complexes :

- **L'analyse du système** consiste à définir les limites du système à modéliser, à identifier les éléments importants ainsi que les types de liaison et d'interaction entre ces éléments et à les hiérarchiser.
- **La modélisation** vise à représenter de la meilleure façon possible un objet réel par un ou des modèles sous forme mathématique. D'une manière générale, lors de l'élaboration du modèle, trois types de données sont nécessaires : les paramètres chimiques (réactions,

produits formés, cinétiques et mécanismes), les paramètres de transfert (matière, énergie, quantité de mouvement) et l'hydrodynamique caractérisant les équipements.

- **La simulation** étudie le comportement d'un système. Elle permet, en particulier, d'étudier l'évolution du système en faisant varier un ou plusieurs facteurs et en confrontant les valeurs calculées aux valeurs observées.

# III. Types de simulation et autres concepts

On peut distinguer principalement deux types de simulation dans le cas des procédés chimiques : la simulation statique (steady state) et la simulation dynamique (transient state).

## 1. Simulation statique

La simulation statique d'un procédé vise à définir les propriétés des flux (débit, température, fraction vaporisée, ...), ainsi que les bilans matière et d'énergie en régime stabilisé. Le procédé est décomposé en blocs représentant les différentes opérations unitaires mises en oeuvre. Les blocs sont liés entre eux par des flux de matière ou d'énergie.

## 2. Simulation dynamique

La simulation dynamique d'un procédé vise à définir les propriétés des courants en fonction du temps, pendant des situations transitoires où le régime n'est pas stable.

## 3. Degrés de liberté

Si un procédé est "correctement spécifié", toutes les variables du procédé doivent pouvoir être déterminées en utilisant l'information fournie.

Les variables, incluent toutes les propriétés des courants de matière (débit total, composition, température et pression), tous les courants d'énergies ainsi que les caractéristiques des équipements (efficacité adiabatique des pompes, taux de conversion des réacteurs chimiques, efficacités des plateaux et pertes thermiques pour les colonnes à distiller,…).

Les variables dont les valeurs sont connues sont appelées « variables de conception », alors que celles calculées sont appelés « variables d'état ». En général, on peut assigner n'importe quelle valeur à une variable de conception, et la valeur est indépendante des valeurs assignées aux autres variables de conception.

**Le nombre de degrés de liberté (ndl)** est égal au nombre de variables inconnues moins le nombre d'équations indépendantes pouvant être établies pour les calculer.

- **Si ndl = 0** le procédé **est spécifié correctement**.
- **Si ndl > 0** le procédé est **sous-spécifié** et **ndl** variables d'état doivent être spécifiées, donc changées en variables de conception.
- **Si ndl < 0** le procédé est **sur-spécifié** et **ndl** variables de conception doivent être transformées en variables d'état.

***Note !*** : Dans le cas d'un système sous-spécifié, il ne faut pas assigner des valeurs en contradiction avec les équations établies.

**Les équations** peuvent inclure des bilans de matière, des bilans énergétiques, des équations d'état, des relations d'équilibre de phases (équilibre thermique, équilibre mécanique), des équations de compression adiabatique, des équations d'équilibre chimique, des relations de séparation des composés, des équations de récupération de composé,...

**Les équations indépendantes** sont un ensemble d'équations dont aucune ne peut être obtenue par combinaisons algébriques des autres. Par exemple, si N composés sont impliqués dans une unité, alors N bilans de matière indépendants peuvent être écrits (un pour chaque composant). Cependant, le bilan de matière global ne peut pas être ajouté à cet ensemble, car il peut être dérivé en faisant la somme des bilans par composé.

## 4. Procédure de calcul

Les procédures de calcul sont souvent représentées sur un diagramme de blocs. Ces diagrammes sont des diagrammes de procédure (procedural flowcharts).

Comment est-il construit ?

1. Dessinez des boîtes et des flèches.

2. Remplissez les boîtes avec du texte.

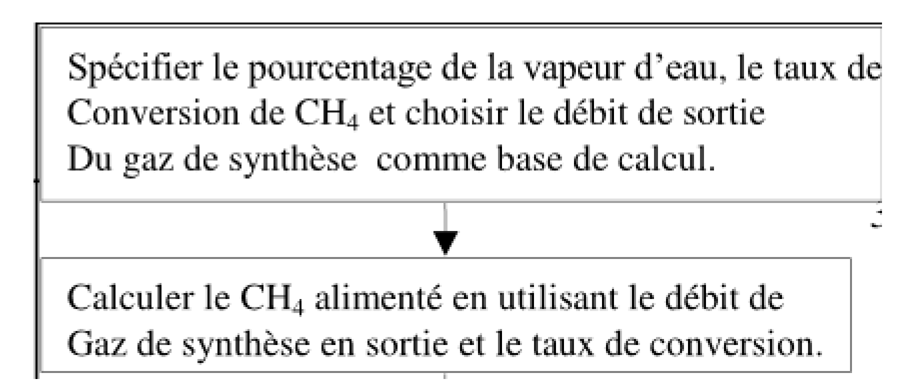



**Figure 2.** Procédure de calcul dans le craquage de $CH_4$.

Les calculs représentés dans l'exemple précédant sont **séquentiels**. Ce n'est pas toujours le cas, parfois des blocs de décision doivent être utilisés, notamment pour les procédures itératives.
**Les blocs de la décision** sont dessinés généralement comme indiqué au-dessous. Une question est placée dans la boîte. La trajectoire suivie de cette boîte dépendra de la réponse (Oui ou Non).

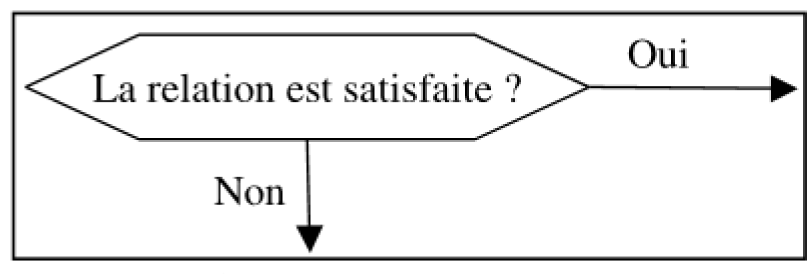



**Figure 3.** Bloc de décision.

## 5. Méthodes de simulation

Méthodes pour la simulation des procédés :

1) Simulation modulaire séquentielle.
2) Simulation basée sur les équations.
3) Simulation combinée.

La plupart des simulateurs de procédés modernes utilisent la troisième méthode, mais on doit comprendre les premières deux méthodes afin de bien comprendre la méthode combinée.

### 1) Simulation modulaire séquentielle

Dans la simulation modulaire séquentielle, le diagramme du procédé (process flowchart) est dessiné en utilisant une série d'unités du procédé : agitateur, séparateur, unité de séparation « flash », colonne à distiller, réacteur à conversion fixe, échangeur de chaleur... Ces unités standards sont appelées « blocs », « modules » ou « unités de simulation ».

Un programme informatique, par module, prend les données des courants d'entrée et calcule les propriétés des courants de sortie. Ces calculs sont réalisés de gauche à droite, unité par unité, jusqu'à ce que toutes les variables soient calculées.

Si la base de conception implique un courant de sortie, plutôt qu'une entrée, alors les résultats du calcul doivent être supposés.

Il n'y a rien de magique dans les calculs exécutés dans chaque module. Ils impliquent simplement la résolution des équations de bilans de matière, de bilans d'énergie, et toutes les autres relations standards concernant cette unité en particulière.

Dans les modules plus complexes, tel qu'une séparation « flash », les relations d'équilibre sont ajoutées aux bilans de matière et énergétiques.

**Systèmes cycliques et bloc de convergence**

Si le procédé inclut des courants de recyclage, alors la simulation modulaire séquentielle décrite au-dessus ne fonctionnera pas, parce qu'il y a des courants d'alimentation, pour quelques unités, dont les propriétés dépendent des unités en aval qui n'ont pas été analysées.

Alors, un calcul itératif est exigé et les propriétés du courant d'entrée sont supposées. Une fois les calculs séquentiels accomplis, les propriétés calculées pour le courant de recyclage sont comparées à celles supposées. Si elles sont égales (avec une tolérance prédéfinie), alors les résultats sont acceptés. Sinon, des calculs complémentaires doivent être faits jusqu'à la convergence.

Sur le diagramme du procédé, on doit inclure une unité fictive pour le courant de recyclage, celui-ci est appelé « bloc de convergence » ou « module de recyclage ». Le courant choisi pour contenir le bloc de convergence est appelé « courant de glissage » et le meilleur courant à choisir est celui avec le moins de variables inconnues. Les estimations initiales pour le courant de glissage doivent être introduites dans le bloc de convergence.

Dans la méthode de « substitution consécutive », les valeurs supposées pour le courant de glissage sont replacées lors de la deuxième itération par les valeurs calculées. Cette méthode est lente et, afin d'accélérer la convergence, d'autres méthodes plus puissantes sont utilisées.

La méthode d'accélération de Wegstein et la méthode de Newton sont les techniques d'itération les plus utilisées.

**Spécifications de conception**

Pour la simulation modulaire séquentielle, il est supposé que les calculs sont exécutés de gauche à droite. Les propriétés du courant d'alimentation sont connues et les propriétés du courant de sortie sont calculées pour chaque unité.

Il est souvent nécessaire de spécifier une propriété d'un courant de sortie, par exemple la spécification du taux de récupération d'un composé dans un procédé de séparation, et de calculer les conditions des courants d'alimentation. Ceci peut être fait en utilisant ce qu'on appelle les « spécifications de conception ». Pour cela, une boucle est créée dans le cycle des calculs par rapport à la propriété désirée pour le courant de sortie. Le bloc de convergence (Adjust Module) est utilisé pour ajuster le courant d'entrée, jusqu'à ce que le courant de sortie calculé soit égal à la valeur spécifiée.

### 2) Simulation basée sur les équations du procédé

Cette méthode implique le rassemblement de toutes les équations du procédé et le résolution simultanée pour calculer les variables inconnues.

Cette méthode est facile à visualiser et à programmer sur un ordinateur, mais il relève de l'exploit lorsqu'on est face à un procédé chimique complexe. Ceci est dû au fait que l'analyse des degrés de liberté devient extrêmement complexe.

Dans le développement des logiciels de simulation modernes, l'approche modulaire séquentielle est retenue de manière globale et la simulation basée sur les équations est utilisée pour analyser chaque bloc individuellement. Ainsi, on élimine beaucoup de boucles de convergence, nécessaires pour les spécifications de conception. De manière simple, tout module spécifié correctement est calculé à partir des variables fournies (entrée ou sortie).

## 6. Logiciels de simulation des procédés

Il existe un très grand nombre de logiciels de simulation des procédés chimiques sur le marché. Ci-après, on présente une liste non-exhaustive des logiciels les plus utilisés au niveau mondial : (Aspen, Chemcad, DesignII, Hysys, Ideas, Indiss, Prosim, ProII, Sim42).

Le logiciel utilisé pour ce cour est le ***HYSYS*** de la société Hyprotech qui est une filiale du groupe Aspentech. Il existe deux versions du logiciel : HYSYS.Process (simulation à l'état stationnaire) et HYSYS.Plant (simulation dynamique). On présente par la suite le logiciel ainsi qu'un exemple de simulation.

# 7. Le logiciel HYSYS

## 1. Présentation de HYSYS

HYSYS n'est pas le logiciel de simulation le plus flexible, ni le plus utilisé dans l'industrie, mais il a l'avantage d'être convivial et facile à utiliser une fois que les éléments de base sont compris. HYSYS a été développé pour l'industrie du pétrole, bien qu'il soit utilisé pour d'autres types de procédés chimiques. Les simulations sont accomplies en utilisant les outils des menus. En plus, il dispose d'une interface graphique pour la construction des diagrammes du procédé (PDF – Process Flow Diagrams). On présente ici les étapes nécessaires pour une simulation.

## 2. Choix des composés (Components)

Il y a beaucoup de composés dans la bibliothèque et ils sont classés en groupes. Lorsqu'il

est possible, les composés peuvent être trouvés en utilisant des filtres et ajoutés à la liste des

composés du procédé à simuler.

Des difficultés peuvent se produire lorsque :

a. le fluide ne peut pas être séparé en composés individuels, comme dans le cas du pétrole.
b. le composé n'est pas dans la bibliothèque du logiciel.

Dans ces cas, les difficultés peuvent souvent être surmontées en définissant un composé hypothétique, avec une quantité minimale de propriétés de base spécifiées par l'utilisateur. L'ensemble complet des propriétés pour le composé sera alors estimé par le logiciel. Dans ces cas, l'utilisateur doit être vigilant pour s'assurer que les composés se comportent correctement dans la simulation.

## 3. Les modèles thermodynamiques (Property Packages)

L'utilisateur doit sélectionner le modèle thermodynamique à utiliser pour calculer les propriétés de mélange (masse volumique, enthalpie,...) ainsi que pour calculer l'équilibre de phases dans les courants et dans les unités de séparation.

Le modèle le plus simple suppose un comportement de gaz idéal pour la phase gaz et un comportement de solution idéal pour la phase liquide. Donc, on utilise la loi de Raoult pour les calculs de l'équilibre de phases. Dans HYSYS, ce modèle est appelé « Antoine », parce qu'il utilise l'équation d'Antoine pour le calcul des pressions de vapeur. Les propriétés de mélange pour le liquide sont calculées à partir des moyennes des propriétés individuelles.

Pour les mélanges d'hydrocarbures légers, les équations d'état, telle que celle de Peng-Robinson, ou celle de Soave-Redlich-Kwong ou une méthode d'états correspondants comme celle de Lee-Kesler Plocker, sont utilisées couramment. Celles-ci peuvent être trouvées à l'aide du filtre EOS (Equations of State).

Pour des composés présentant un caractère de solution non-idéale (i.e. éthanol + eau), un modèle de type « loi de Raoult modifiée » doit être utilisé. Ceux-ci sont appelés « modèles à coefficient d'activité ». Ils peuvent être trouvés avec le filtre « Activity Models ». Quelques exemples sont les modèles NRTL et UNIQUAC.

Il existe d'autres modèles spéciaux dans HYSYS, notamment pour estimer les propriétés de l'eau (y compris en phase vapeur) et pour les électrolytes.

## 4. Les diagrammes du procédé (PFD – Process Flow Diagram)

La base d'une simulation est le développement du PFD. Ceci est fait en sélectionnant des unités dans la palette d'objets et en les déposants sur la feuille du procédé. De même, tout courant de matière et d'énergie doit être placé sur le PFD. Chaque courant d'entrée ou de sortie est connecté à une unité. Les courants et les unités sont nommés et ordonnés sur le PFD afin de faciliter la compréhension du diagramme du procédé.

Les calculs sont exécutés successivement de gauche à droite, alors la procédure consiste à définir les courants d'alimentation (sur le côté gauche des unités). Ensuite, introduire autant de spécifications que nécessaires pour la première unité rencontrée, afin de pouvoir la calculer. Cette procédure est valable pour toutes les unités.

S'il existe des courants de recyclage ou des spécifications ne pouvant pas être calculées directement par le logiciel avec la procédure normale, on doit ajouter des modules logiques au PFD. Ceux-ci incluent le « Recycle Module », le « Set Module » et le « Adjust Module ».

## 5. Les étapes d'utilisation du logiciel HYSYS

Pour réaliser une simulation en HYSYS, les pas suivants sont nécessaires :

1. Choix des composés
2. Sélection d'un modèle thermodynamique
3. Construction du PFD
4. Spécification des courants et des unités
5. Exécution du programme de simulation
6. Interprétation des résultats

Ces étapes seront utilisées ci-dessous avec un exemple d'application.

- Application:

Quelle est la quantité de chaleur nécessaire pour chauffer un courant (1250 kg/s), composé d'une quantité équimolaire de méthane et d'éthane, de 20°C à 200°C à une pression constante de 100 bar ?

Choix des composés

Exécuter le programme HYSYS et choisir New case dans le menu File. Cela ouvre la fenêtre Simulation Basis Manager. Cliquer sur le bouton Add. La fenêtre Fluid Package s'ouvre sous l'onglet Prop Pkg. Aller sur l'onglet Components. Sélectionner les composés nécessaires à la simulation, l'un après l'autre en introduisant le nom dans la case Match et en cliquant à chaque fois sur Add Pure. Dans le cas présent on choisira Ethane et Methane. Aller ensuite sur l'onglet Prop Pkg.

Nouvelle simulation

Choisir composés inclus dans le procédé

Choisir réactions du procédé

Choisir modèle pour calculs

Fluid Package: Basis

Base Property Package Selection

<none>
Antoine
ASME Steam
Braun K10
Chao Seader
Chien Null
Esso Tabular
Extended NRTL
GCEOS
General NRTL

Property Pkg Filter
All Types
EOSs
Activity Models
Chao Seader Models
Vapour Press Models
Miscellaneous Types

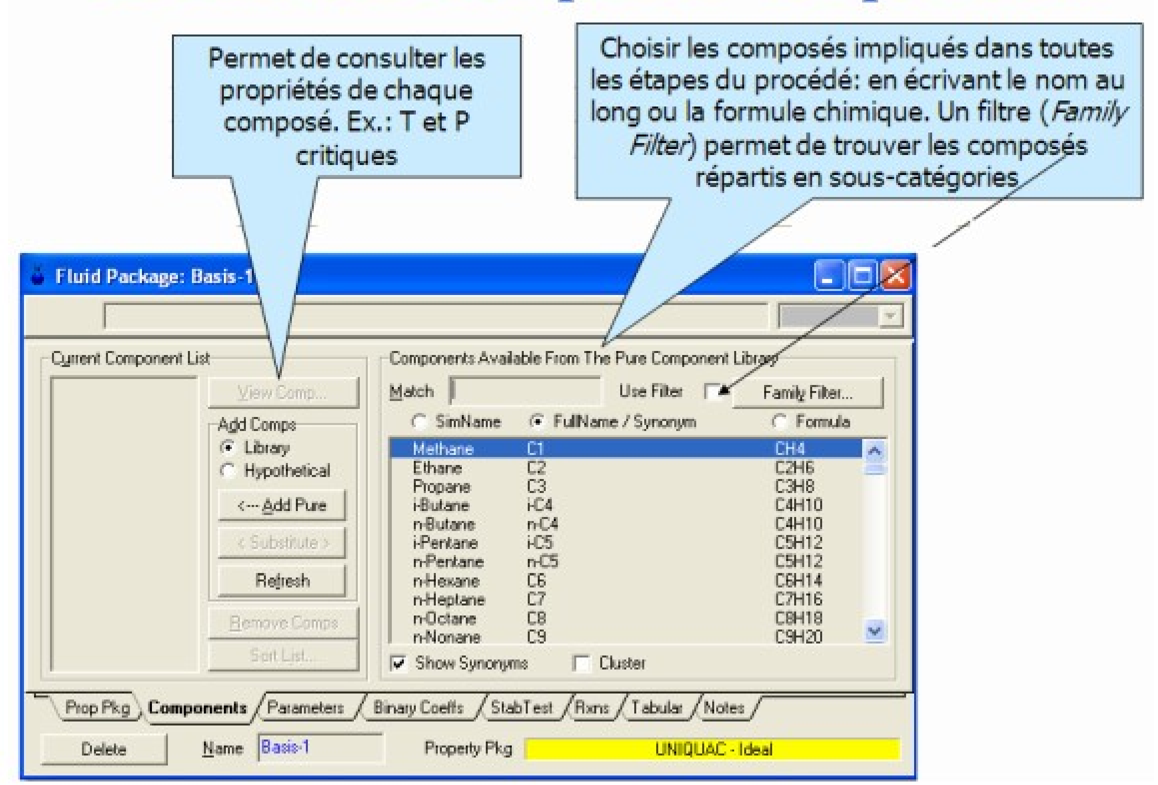
Component Selection Control
Only Property Package Compatible Components
Full Pure Component Library (Including Non-Recommended Components)

Prop Pkg | Components | Parameters | Binary Coeffs | StabTest | Rxns | Tabular | Notes

Delete | Name Basis-1 | Property Pkg <None>



# Choix des composés du procédé



- Sélection d'un modèle thermodynamique

Sur la fenêtre Prop Pkg, sélectionner le filtre EOSs (Equations of State). A l'aide de la souris choisir l'équation Peng-Robinson. Fermer cette fenêtre et observer que dans la fenêtre Simulation Basis Manager apparaît une ligne indiquant le nombre de composés sélectionnés (2) et le modèle thermodynamique choisi (Peng-Robinson).

Appuyez sur le bouton Enter Simulation Environment pour aller à la fenêtre de construction du PFD. Si vous voulez modifier les composés ou le modèle thermodynamique en cours de simulation, cliqué sur le bouton Simulation Basis Environment (icône du flacon sur le toolbar).

- Considération thermodynamique :
- Pour deux types de calculs:
  - ✓ Équilibre Liquide-Vapeur (VLE: Vapor-Liquid Equilibrium)
  - ✓ Enthalpie/Entropie
- Catégories d'équations:
  - ✓ Équations d'état (Equations of State, EOS) Ɔ̃ systèmes d'hydrocarbures
  - ✓ Modèles d'activité (Activity Models) Ɔ̃ systèmes pour autres composés
  - ✓ chimiques
  - ✓ Modèles semi-empiriques Ɔ̃ systèmes d'hydrocarbures lourds
  - ✓ Autres Ɔ̃ pour amines, vapeur d'eau (ASME Steam)…
- Équations d'état
  - Plus souvent utilisées pour composés non polaires ou peu polaires
  - Plus souvent utilisées Ɔ̃ Peng-Robinson (PR) et Soave-Redlich-Kwong (SRK)

| Method | Temp (°F) | Temp (°C) | Pressure (psia) | Pressure (kPa) |
|---|---|---|---|---|
| PR | > -456 | > -271 | < 15,000 | < 100,000 |
| SRK | > -225 | > -143 | < 5,000 | < 35,000 |

  - Benedict-Webb-Ruben-Starling (BWRS) Ɔ̃ plus efficace pour hydrocarbures paraffiniques légers que les autres équations d'état
- Modèles d'activité
  - Margulies
  - NRTL (Non-Random Two Liquid)
  - UNIQUAC (UNIversal QUasi-Chemical Activity Coefficient)
  - van Laar
  - Wilson

| APPLICATION | Margules | van Laar | Wilson | NRTL | UNIQUAC |
|---|---|---|---|---|---|
| Binary Systems | A | A | A | A | A |
| Multicomponent Systems | LA | LA | A | A | A |
| Azeotropic Systems | A | A | A | A | A |
| Liquid-Liquid Equilibria | A | A | N/A | A | A |
| Dilute Systems | ? | ? | A | A | A |
| Self-Associating Systems | ? | ? | A | A | A |
| Polymers | N/A | N/A | N/A | N/A | A |
| Extrapolation | ? | ? | G | G | G |

*A = Applicable; N/A = Not Applicable;? = Questionable; G = Good;*
*LA = Limited Application*

- Autres
  - Modèles de tensions de vapeur Ɔ̌ pour systèmes d'hydrocarbures lourds; seulement à basses pressions et hautes températures
  - Chao-Seader (CS) --> systèmes comprenant majoritairement de l'eau en phases liquide ou gazeuse; mélanges d'hydrocarbures légers
  - Grayson-Streed (GS) --> systèmes comprenant majoritairement de l'eau en phases liquide ou gazeuse; systèmes à fortes concentrations en hydrogène (H2); colonnes de distillation sous vide.

**Tableau I :** Types de systèmes vs Modèles recommandés

| Type of System | Recommended Property Method |
|---|---|
| TEG Dehydration | PR |
| Sour Water | PR, Sour PR |
| Cryogenic Gas Processing | PR, PRSV |
| Air Separation | PR, PRSV |
| Atm Crude Towers | PR, PR Options, GS |
| Vacuum Towers | PR, PR Options, GS (<10 mm Hg), Braun K10, Esso K |
| Ethylene Towers | Lee Kesler Plocker |
| High H2 Systems | PR, ZJ or GS (see T/P limits) |
| Reservoir Systems | PR, PR Options |
| Steam Systems | Steam Package, CS or GS |
| Hydrate Inhibition | PR |
| Chemical systems | Activity Models, PRSV |
| HF Alkylation | PRSV, NRTL (Contact Hyprotech) |
| TEG Dehydration with Aromatics | PR (Contact Hyprotech) |
| Hydrocarbon systems where H2O solubility in HC is important | Kabadi Danner |
| Systems with select gases and light hydrocarbons | MBWR |

- **Construction du PFD**

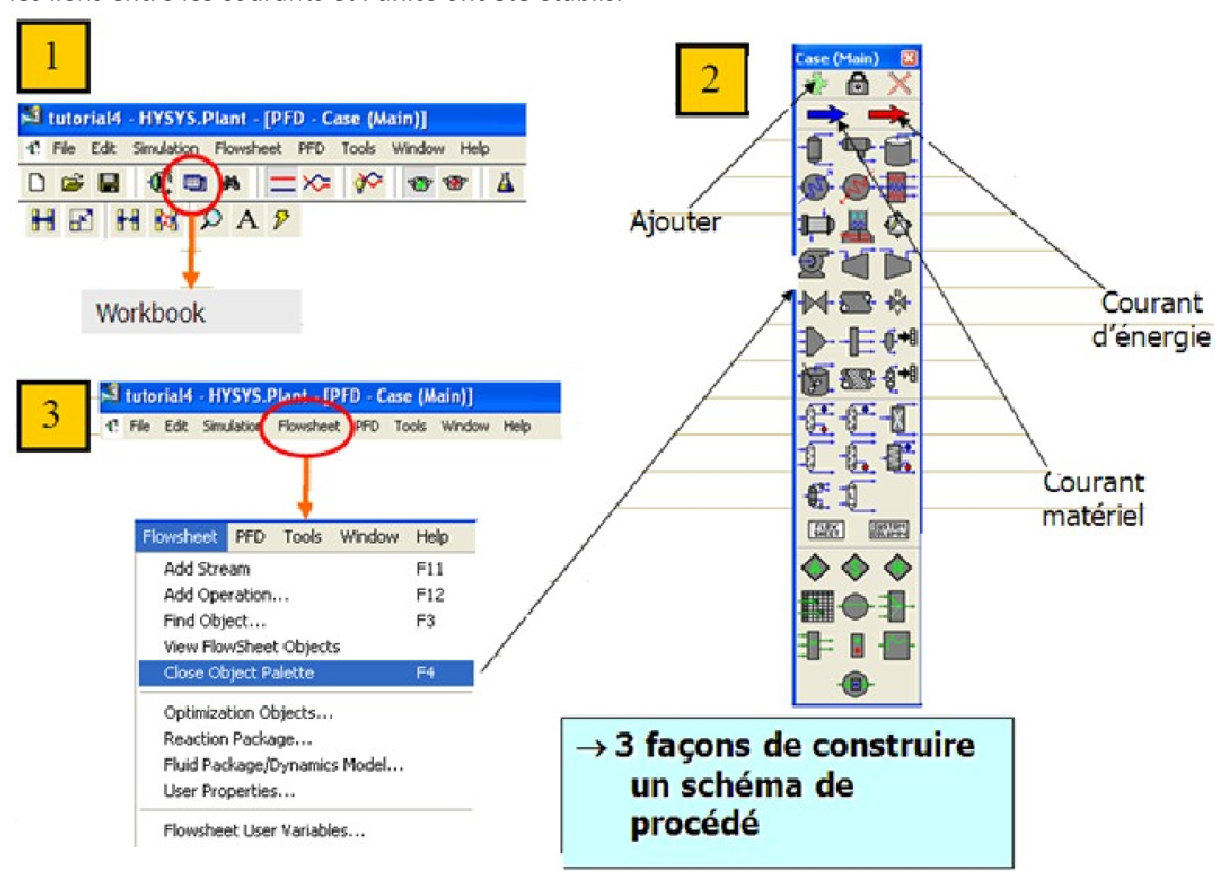
Agrandir la fenêtre PFD-Case(Main). Maintenant, placer les unités sur l'espace de travail du PFD. Ceci est réalisé en sélectionnant les opérations sur la palette d'objets latérale, cliquer sur le bouton gauche pour choisir l'objet, re-cliquer sur le bouton gauche à l'emplacement désiré sur la feuille du procédé.

Dans le cas présent, seulement un échangeur de chaleur est nécessaire. Sélectionnez le Heater dans la palette (symbole du milieu de la 2ème colonne). Le nom E-100 est donné par défaut.

On pourra changer le nom après. Ensuite, placer tous les courants de matière (flèches bleues) sur la feuille. Un courant d'entrée et un courant de sortie sont nécessaires dans l'exemple. Sélectionner l'icône Material Stream (flèche bleue) et placer-la sur la feuille. Cela devrait placer un courant nommé **1**. Cliquer deux fois sur la flèche et changer le nom à Alim. Répéter cette opération pour le courant **2**, placer ce courant à droite de l'échangeur et renommer ce courant **Prod**.

L'étape suivante consiste à placer les courants d'énergie (flèches rouges). Dans l'exemple, un courant d'énergie est nécessaire afin de fournir l'énergie pour chauffer le fluide qui traverse l'échangeur. Sélectionner l'icône Energy Stream (flèche rouge) et placer-le au-dessus de l'échangeur. Le nom par défaut pour ce courant sera **Q-100**. Changer le nom du courant à **Q-Ech** en faisant un double click sur la flèche.

La dernière étape consiste à relier les courants et les unités. Pour cela faire un double click sur l'échangeur **E-100**. Dans la fenêtre qui s'ouvre (Connections) cliquer sur la petite flèche à gauche de la case Inlet et sélectionner le courant **Alim**. Ensuite, faire de même la case **Outlet** pour le courant **Prod** et dans la case Energy choisir **Q-Ech**. Fermer la fenêtre et observer que les liens entre les courants et l'unité ont été établis.



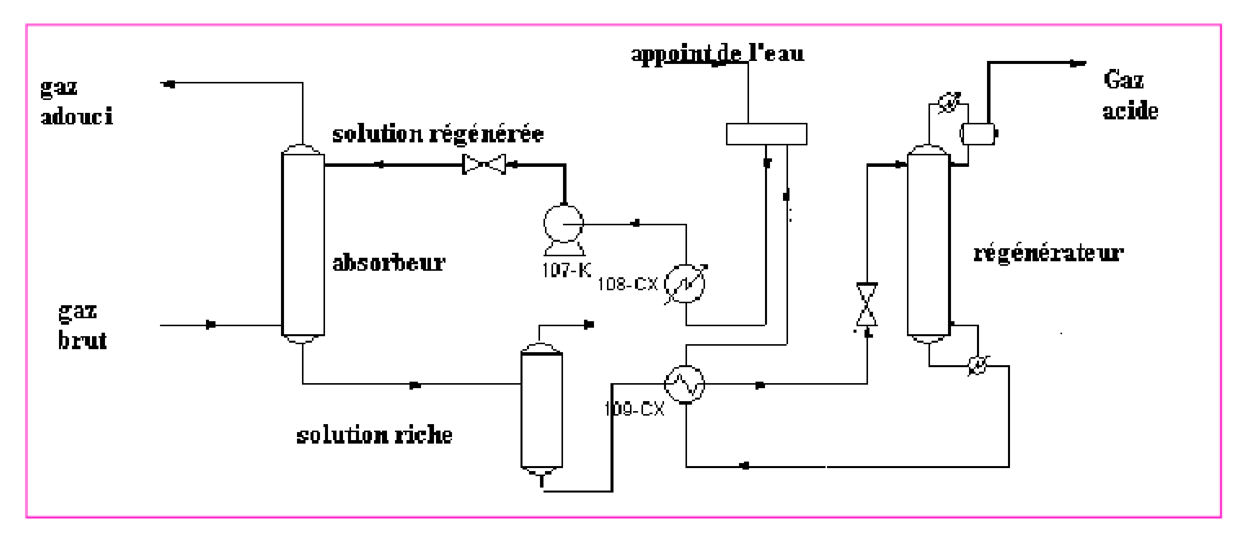



**Fig.** exemple d'un PFD.

- **Spécification des courants et des unités**

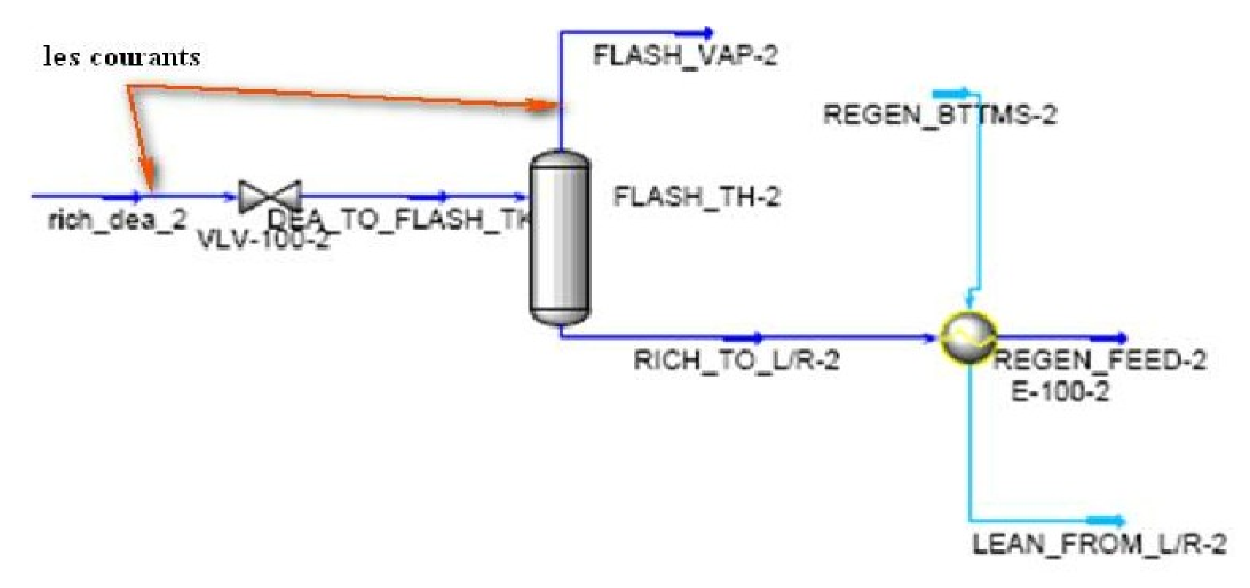
Les spécifications pour les unités sont introduites en faisant un double click sur l'unité correspondante et en choisissant l'option **Paramètres** du menu à gauche. Dans cet exemple, choisir l'échangeur **E-100** et mettre la valeur de 0 pour le Delta P. Ceci implique que la pression de sortie doit être égale à la pression d'entrée. Fermer cette fenêtre.

On doit spécifier les débits et les conditions pour les courants d'entrée. Pour introduire les paramètres des courants, il suffit de faire un double click sur le courant en question. Dans l'exemple, faire un double click sur le courant Alim. On peut introduire le débit, la température et la pression d'entrée dans la fenêtre ouverte mais nous allons définir ces propriétés par un autre moyen qui nous permet de voir l'ensemble des courants. Fermer la fenêtre.

Faire encore un double click sur l'échangeur, aller sur l'onglet Worksheet. Observer que chaque courant est représenté sur une colonne. Introduire les valeurs de 200°C, 100 bar et un débit de **1250 kg/s** pour le courant **Alim**. Regarder qu'à chaque fois les unités par défaut sont dans le système international mais on peut utiliser n'importe quelles unités. Par exemple dans le cas de la pression introduire la valeur **100** et ensuite cliquer sur la petite flèche à coté des unités (en haut à droite), choisir ensuite les unités (bar). Sélectionner l'option Composition sur le menu à droite, le logiciel affiche un tableau avec les compositions des courants d'entrée et de sortie. Mettre **0.5** en méthane pour le courant **Alim** et appuyer sur Enter. Une deuxième fenêtre s'ouvre (Input composition for stream : **Alim**). Sélectionner comme Composition Basis l'option Mole Fractions et introduire 0.5 pour la fraction d'éthane, cliquer sur le bouton **OK**. Regarder que la composition du courant de sortie a été fixée égale à la composition d'entrée.

Cliquer sur l'option **Properties** du menu à gauche. Regarder que le courant **Alim** est complètement défini ainsi qu'un certain nombre de paramètres du courant **Prod**.

Finalement, mettre la valeur 200°C pour la température du courant **Prod**.




- **Exécution du programme de simulation**

Pour faire une simulation, tout ce dont vous avez besoin est de cliquer sur le bouton **Solver** Active (icône avec la lumière verte) sur le **toolbar**. Cela ne devrait pas être nécessaire dans cet exemple, ici la simulation doit être exécutée automatiquement si toutes les spécifications ont été introduites correctement. Lorsque les calculs sont finis les couleurs des courants et des unités changent (les courants son plus foncés et la ligne jaune de l'unité devient noir).

- **Interprétation des résultats**

Les résultats de la simulation peuvent être visualisés en cliquant sur l'icône Workbook du **toolbar**. Lorsque la fenêtre Workbook s'ouvre, on peut observer les propriétés des courants de matière. Cliquer sur l'onglet Energy Streams. Vérifier que la valeur calculée pour **Q-Ech** est de 2.486x109 kJ/h.

Est-ce raisonnable ce résultat ? Avec quelle valeur peut-on comparer cette valeur pour savoir si la valeur est correcte ?

Refaire la simulation en changeant le modèle thermodynamique de Peng-Robinson à Soave-Redlich-Kwong (SRK). Quelle est la valeur de la quantité de chaleur ?

Essayer l'équation Lee-Kessler-Plocker. Quelle est la nouvelle valeur ? Pourquoi est-ce que ces valeurs sont légèrement différentes ?

Regarder qu'on peut changer la valeur affichée pour les courants de matière en utilisant **Shift-N** (pour le nom), **Shift-P** (pour la pression), **Shift-F** (pour le débit) et **Shift-T** (pour la température).

Afficher un tableau avec les propriétés des courants sur la feuille du procédé. Pour cela, ouvrir la fenêtre Workbook et cliquer sur l'option Setup du menu Workbook de la barre des menus. Sur Materials Streams, enlever les variables Liquide Volume Flow et Heat Flow en utilisant le bouton **Delete**. Ajouter la composition du courant (Comp Mole Frac (Ethane) et Comp Mole Frac (Methane)) en utilisant le bouton **Add**. Fermer les fenêtres Setup et Workbook. Faire un click droit sur la feuille du procédé et choisir Add Workbook Table et Materials Streams. Pour enlever le tableau faire un click droit et choisir Hide. Le résultat final est montré sur la figure 3.

Finalement, il est possible d'enregistrer le fichier et d'imprimer le PFD ou le Workbook en utilisant les options correspondantes dans le menu File.